

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА ТУШЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭМИССИИ СЕРЫ S₂ В ПЛАМЕНИ ВОДОРОД- ВОЗДУХ

Зайцева М.В., Пупышев А.А.

Физико-технологический институт уральского федерального
университета

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

В работе [1] экспериментально изучен механизм тушения газами C₈H₁₈, CH₄, CO₂ и CO молекулярной эмиссии S₂ в импульсном пламенном (водород-воздух) фотометрическом детекторе (ИПФД), используемом для газохроматографического определения серосодержащих компонентов. Авторы [1] пришли к заключению, что этот эффект обусловлен связыванием S в соединение COS в результате протекании реакции S+CO=COS.

Сера в данном пламени может образовывать много соединений (SO₂, SH, H₂S, COS, CS, CS₂), которые авторы [1] экспериментально не контролировали. Для проверки их выводов нами было проведено термодинамическое моделирование термохимических процессов в ИПФД с использованием программы TERRA, исходных экспериментальных данных [1] и учете в расчетах всех наиболее вероятных в равновесии индивидуальных веществ. Расчеты проведены для адиабатических температур горения и более низких температур с шагом 200 K, что учитывает импульсный характер горения пламен.

Установлено, что при температурах существования пламен, значительно меньших адиабатических, действительно возможно тушение эмиссии S₂ вышеуказанными газами. Анализ расчетного равновесного состава пламен при этих температурах показал, что при снижении концентрации молекул S₂ происходит пропорциональное увеличение содержания COS для тушителей C₈H₁₈, CH₄ и CO. Наиболее сильным тушителем свечения S₂ является октан, что совпадает с экспериментом. В случае тушителя CO₂ сера связывается, согласно расчетам, в молекулы SO₂, но расчетная степень тушения не совпадает с экспериментом.

1. Kalontarov L., Jing H., Amirav A., Cheskis S. Mechanism of sulfur emission quenching in flame photometric detectors // J. of Chromatography A. 1995. V.696. P. 245-246.